

# Grupo de Investigación UJA 'Química Física Teórica y Experimental (FQM 173)'

## **Observar a las moléculas vibrar para comprender su estructura y reactividad**

El grupo de investigación de la Universidad de Jaén (UJA) 'Química Física Teórica y Experimental (FQM 173)' lleva casi treinta años enfocado en el estudio de la estructura molecular y otras propiedades relacionadas, desde el prisma que ofrecen las técnicas y metodologías de trabajo de la espectroscopía vibracional.

Para este fin emplea estrategias de trabajo que aúnan la experimentación con el modelado molecular y el estudio in silico de los sistemas de interés. Estos han abarcado un amplio rango durante la trayectoria del grupo, yendo desde moléculas heterocíclicas sencillas, hasta compuestos organosilícicos de interés industrial y biomédico, sistemas quirales de interés biológico y atmosférico e incluso restos arqueológicos de origen ibero.

Las líneas de investigación vigentes en la actualidad en el grupo se pueden encuadrar dentro de lo que puede calificarse como investigación básica o fundamental y son:

1. Espectroscopía vibracional teórica
2. Espectroscopías vibracionales clásicas (IR, Raman) y quiroópticas (VCD, ROA) aplicadas a la caracterización de sistemas de interés biológico y atmosférico
3. Química computacional aplicada a la modelización molecular de sistemas de interés biológico e industrial
4. Caracterización espectroscópica de muestras del patrimonio histórico-artístico

Fruto del trabajo en estas líneas y hasta la fecha, el grupo ha gestionado alrededor de 60 proyectos y ayudas a la I+D+i de carácter internacional, nacional, autonómico y local, ha recibido (en estancias de investigación) a alrededor de una veintena de investigadores de otros países y, en menor medida, también de otras universidades y centros de investigación españoles, ha formado a alrededor de una treintena de doctores y másteres (o equivalentes).

Además, cuenta con alrededor de 230 publicaciones científicas JCR y alrededor de 330 aportaciones a congresos. Asimismo, en este tiempo ha colaborado (y continúa haciéndolo) con un buen número de investigadores y grupos de investigación de diferentes países y continentes (especialmente de Europa y América), así como también del ámbito nacional, autonómico y local (UJA).

### Grupo de investigación

Este grupo de investigación de la UJA está formado por: **Juan Jesús López González (investigador principal), Fernando Márquez López, Manuel Montejo Gámez, María del Pilar Gema Rodríguez Ortega, María del Mar Quesada Moreno, Francisco Partal Ureña, Ana África Márquez López, Igor Ignatyev, Francisco Hermoso Torres, Rubén Casas Jaraíces y Magdalena Sánchez Valera.**

[Más información de este grupo de investigación](#)